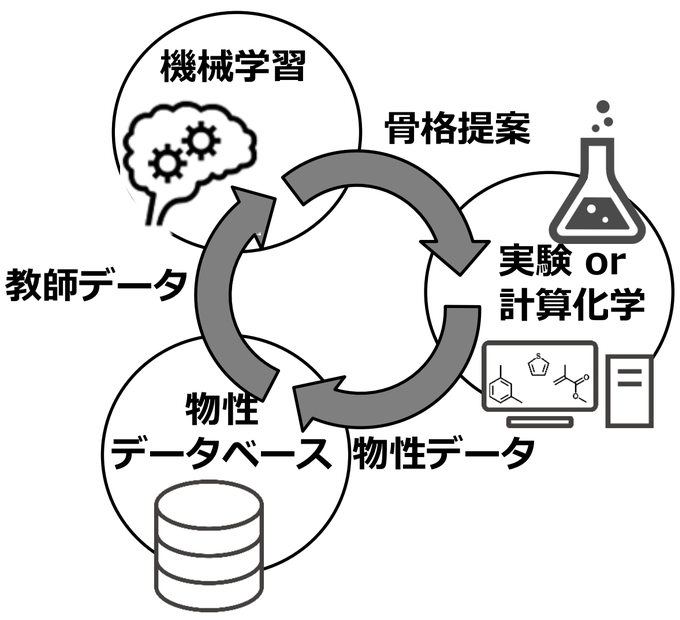
高分子インフォマティクスのための 分子動力学計算による高分子物性データベースの開発

林　慶浩　　ものづくりデータ科学研究センター　特任助教

背景

高分子はプラスチックやゴムに代表されるように，身近に使用されている素材である．一方で，データ科学に資する高分子材料の物性データベースは，現時点では存在していない．よってデータ駆動型の材料開発を高分子材料に適用するために，高分子材料の物性データベースの構築が求められている．高分子材料の計算物性データベース構築のために，分子動力学（MD）シミュレーション自動化システムの開発を行った.

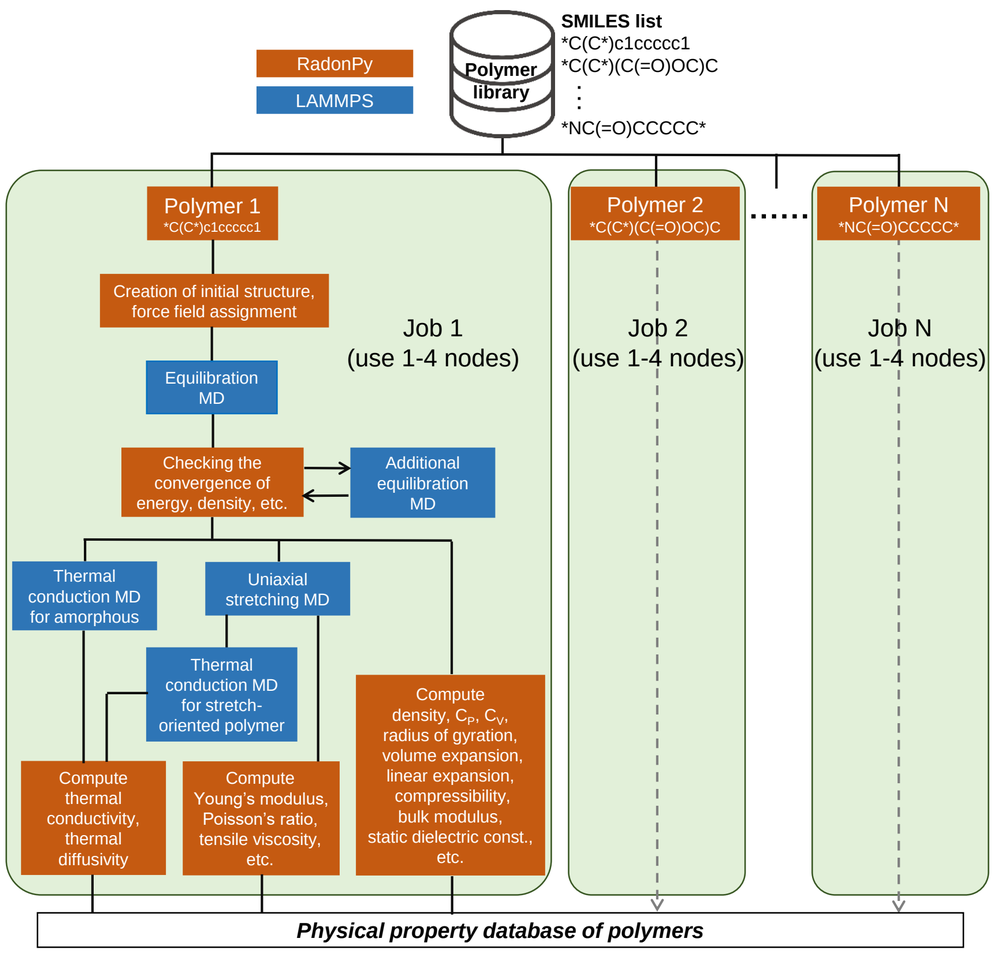
データ駆動型材料探索



MD計算+高分子物性

分子動力学計算による高分子物性自動計算システムRadonPyの開発

Open source
近日中に公開予定



入力:
- 繰り返し単位のSMILES
- 末端構造のSMILES
- 重合度
- 温度, etc.

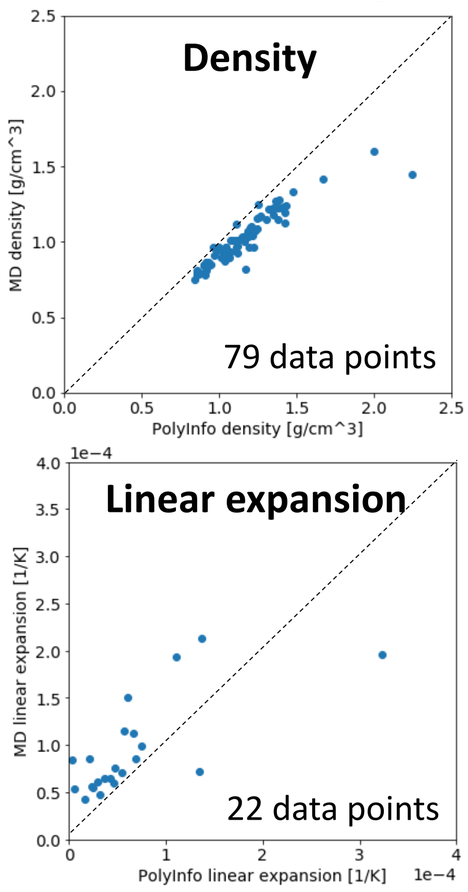
初期構造の作成、力場の割り当て、平衡化MD、平衡状態の確認、非平衡MD、物性値算出など一連の工程を全自動化

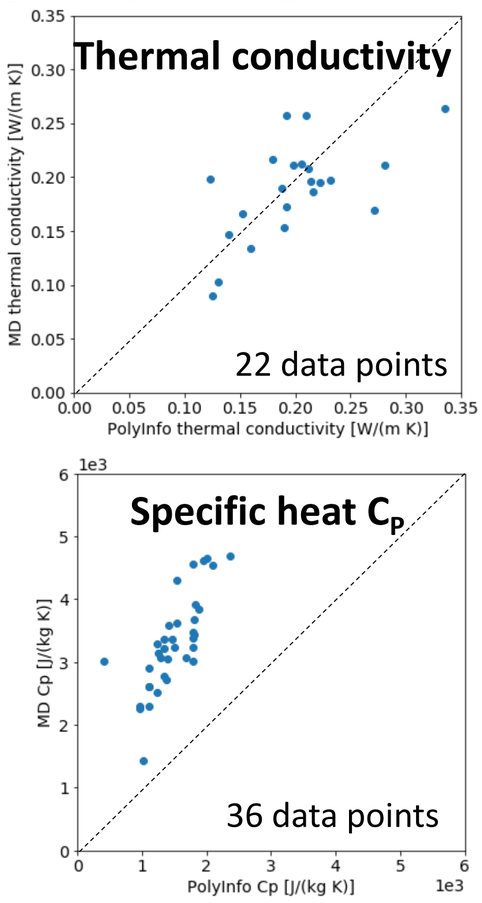
アモルファス、延伸配向、混合系に対応

14種類の物性を自動計算

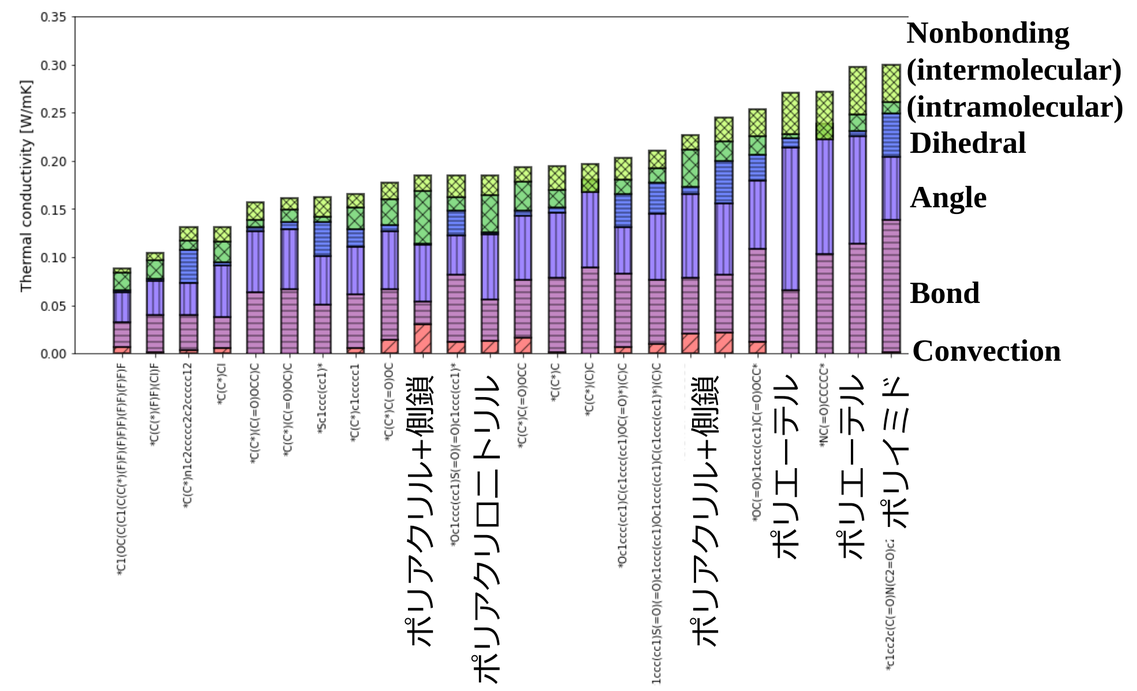
MD計算にはLAMMPSを使用

物性値の計算結果(実験値(PoLyInfo)との比較)





物性値の計算結果(熱伝導率の成分分割解析)



ポリイミド：bond項が大きい（剛直鎖を反映）
ポリエーテル：angle項が大きい（C-O-C変角が柔軟であることを反映）
アルキル側鎖あり：convection項が大きい（側鎖の運動性を反映）
アクリル、アクリロニトリル：nonbonding項が大きい
（静電相互作用やdipole-dipole相互作用を反映）

Force field (FF) descriptor の開発

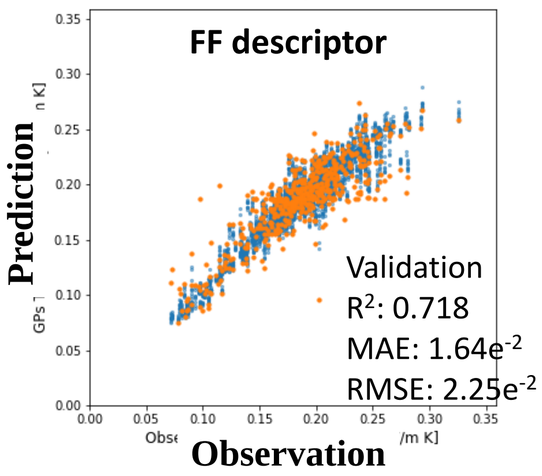
MDシミュレーション用の力場パラメータ(9個)を記述子化
力場パラメータ：
→ 基本的な物理化学的相互作用を表す
→ 原子の周辺環境により異なる値が割り当てられる

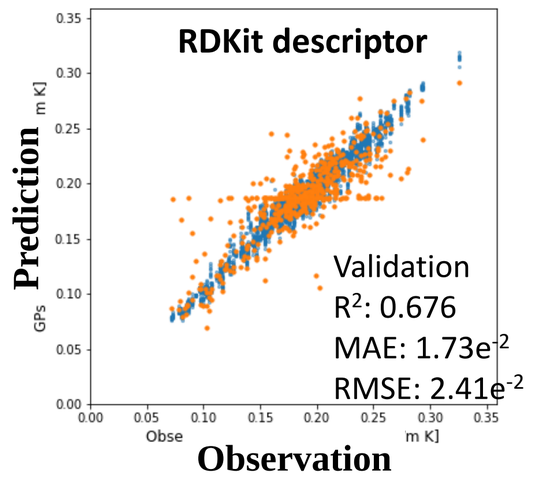
Parameters on atoms	Mass, Charge, Strength of vdW interaction(ε), Equilibrium distance of vdW interaction(σ)
Parameters on bonds	Force constant of bonds (K_{bond}), Equilibrium distance of bonds (r_0)
Parameters on angles	Force constant of angles (K_{angle}), Equilibrium angles (θ_0)
Parameters on dihedrals	Force constant of dihedral angles (K_{dih})

分子によってベクトル長が異なる
→ **カーネル平均を用いて固定長化**

Gaussian process regression (10-fold CV)

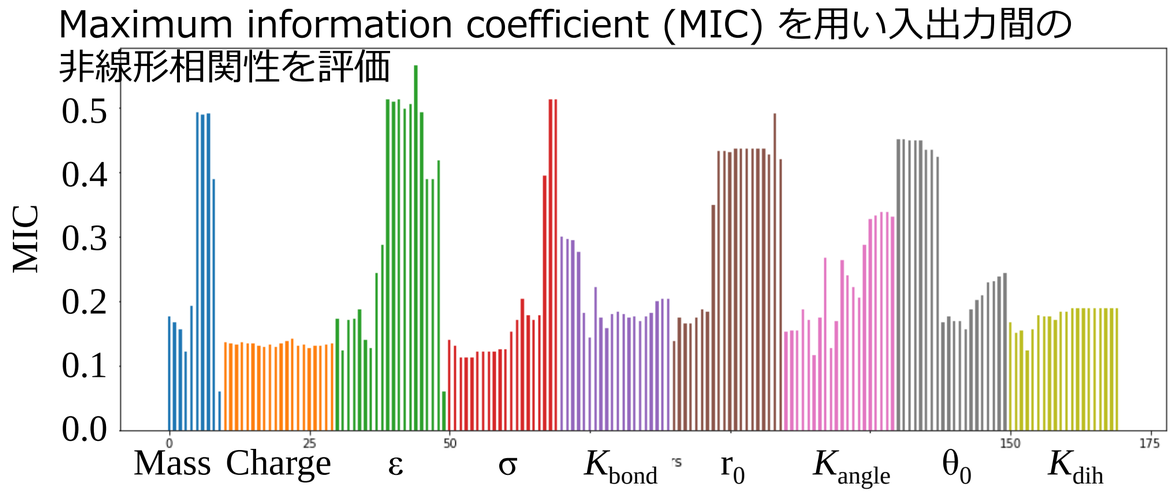
Dataset: 500 points の熱伝導率のMD計算値





データ科学的手法による物理化学的知見抽出の試み

Maximum information coefficient (MIC) を用い入出力間の非線形相関性を評価



高分子の熱伝導率にはvdW相互作用の強さ(ε)が重要